

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah.....	4
1.4 Tujuan Penelitian	5
1.5 Manfaat Penelitian	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	6
BAB III LANDASAN TEORI	10
3.1 Konsep Pita Energi.....	10
3.1.1 Model elektron hampir bebas.....	10
3.1.2 Model elektron bebas	12
3.1.3 Teorema Bloch	13
3.2 <i>Spin-Orbit Interaction</i> dalam Zat Padat.....	16
3.2.1 Efek Rashba	19
3.2.2 Efek Dresselhauss	19
3.2.3 <i>Spin-Orbit Splitting</i>	20
3.2.4 <i>Persistent Spin Helix</i>	22
3.3 Teori Gangguan $k.p$	23
3.4 Material Perovskite Feroelektrik Oksida	27
3.5 Metode Komputasi	30
3.5.1 Sistem Banyak Partikel	30
3.5.2 Pendekatan <i>Born-Oppenheimer</i>	31
3.5.3 Pendekatan <i>Hartree</i>	32
3.5.4 Pendekatan <i>Hartree-Fock</i>	33
3.6 Struktur Elektronik dengan Pendekatan <i>Density Functional Theory</i>	34
3.6.1 Teorema <i>Hohenberg-Kohn</i>	34
3.6.2 Pendekatan <i>Kohn-Sham</i>	36

3.6.3	Energi <i>Exchange-Correlation</i> : Pendekatan <i>Generalized Gradient Approximation</i>	39
3.6.4	Fungsi Gelombang Coba: Orbital Berbasis <i>Pseudo-Atomic</i>	40
3.6.5	<i>Non-Collinear</i> DFT.....	41
3.6.6	Perhitungan <i>Spin Texture</i>	44
BAB IV METODE PENELITIAN		47
4.1	Tempat dan Waktu Penelitian	47
4.2	Alat dan Bahan Penelitian	47
4.2.1	Peralatan.....	47
4.2.1.1.1	Perangkat Keras yang Digunakan	47
4.2.1.1.2	Perangkat Lunak yang Digunakan	47
4.3	Desain Tahapan Penelitian	48
4.3.1	Studi Literatur	48
4.3.2	Studi Program OpenMX dan Perancangan Input Data	48
4.3.3	Komputasi DFT.....	49
4.3.4	Pemberian Efek <i>Strain</i>	51
4.3.5	Analisis <i>Spin Texture</i>	52
4.3.6	Analisis Data	54
4.3.7	Hasil dan Kesimpulan	54
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN		55
5.1	Hasil Optimasi Parameter Kisi Material BiInO_3	55
5.2	Hasil Optimasi Posisi Atom	57
5.3	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik	60
5.4	Analisis <i>Spin Splitting</i> Dengan Menggunakan Teori $k.p$ Berbasis Simetri	62
5.4.1	<i>Splitting</i> Pada X Point.....	62
5.5	Hasil Perhitungan <i>Spin Texture</i>	71
5.5.1	Analisis <i>Spin Texture</i>	72
5.6	Pemberian Efek <i>Strain</i>	77
BAB VI KESIMPULAN		82
LAMPIRAN.....		87
	Lampiran A	87
	Lampiran B.....	91
	Lampiran C.....	95
DAFTAR PUSTAKA		83